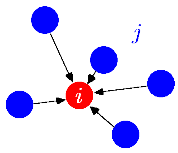
Molekulová dynamika

- tuhé koule ap. – nárazy, algoritmus založen na události „další srážka“
- „klasická“ MD – integrace pohybových rovnic
- Brownovská (stochastická) dynamika, disipativní částicová dynamika = MD + náhodné síly

Potřebujeme **síly**:

$$\vec{f}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}^N)}{\partial \vec{r}_i} \qquad i = 1, \dots, N$$



Příklad – párové síly:

$$U = \sum_{i<j} u(r_{ij}) \quad \Rightarrow \quad \vec{f}_i = \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} \vec{f}_{ji} \equiv -\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} \frac{\mathrm{d}u(r_{ji})}{\mathrm{d}r_{ji}} \frac{\partial r_{ji}}{\partial \vec{r}_i} = -\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} \frac{\mathrm{d}u(r_{ji})}{\mathrm{d}r_{ji}} \frac{\vec{r}_{ji}}{r_{ji}}$$

Značení: $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$, $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$

Newtonovy rovnice

$$\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \ddot{\vec{r}}_i = \frac{\vec{f}_i}{m_i}, \qquad i = 1, \dots, N$$

Metoda konečných diferencí – krok h

Počáteční úloha (známe $\vec{r}$ a $\dot{\vec{r}}$ v čase t_0)

Metody:

- Runge–Kutta: mnoho výpočtů pravé strany
- Prediktor-korektor: lepší, ale . . . (viz dále)
- Verlet a jeho klony (je symplektický = dobré zachování energie)
- “Multiple timestep” metody: více časových škál, obv. symplektické
- Geometrické integrátory (symplektické)

Verletova metoda

Taylorův rozvoj:

$$\begin{aligned} \vec{r}_i(t-h) &= \vec{r}_i(t) - h\dot{\vec{r}}_i(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{\vec{r}}_i(t) - \dots & +1\times \\ \vec{r}_i(t) &= \vec{r}_i(t) & -2\times \\ \vec{r}_i(t+h) &= \vec{r}_i(t) + h\dot{\vec{r}}_i(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{\vec{r}}_i(t) + \dots & +1\times \end{aligned}$$

⇒ numerická 2.derivace: $\ddot{\vec{r}}_i(t) = \dfrac{\vec{f}_i(t)}{m_i} = \dfrac{\vec{r}_i(t-h) - 2\vec{r}_i(t) + \vec{r}_i(t+h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$

Verletova metoda: $\vec{r}_i(t+h) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t-h) + h^2\dfrac{\vec{f}_i(t)}{m_i}$

Počáteční podmínky: $\vec{r}_i(t_0-h) = \vec{r}_i(t_0) - h\dot{\vec{r}}_i(t_0) + \dfrac{h^2}{2}\dfrac{\vec{f}_i(t_0)}{m_i} + \mathcal{O}(h^3)$

- ⊕ časově reverzibilní (⇒ žádný drift celk. energie); dokonce symplektické
- ⊖ nelze použít pro $\ddot{r} = f(r, \dot{r})$, protože $\dot{r}(t)$ není známo v čase t

Identická trajektorie: leap-frog, velocity Verlet, Gear ($m = 3$), Beeman

Metoda leap-frog

rychlost = dráha (změna polohy) za jednotku času h (vektor)

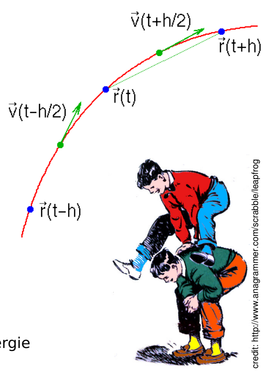
$$\vec{v}(t+h/2) = \frac{\vec{r}(t+h) - \vec{r}(t)}{h}$$

zrychlení = změna rychlosti za jednotku času

$$\vec{a}(t) = \frac{\vec{v}(t+h/2) - \vec{v}(t-h/2)}{h} = \frac{\vec{f}}{m}$$

⇒

$$\left.\begin{aligned} \vec{v}(t+h/2) &:= \vec{v}(t-h/2) + \vec{a}(t)h \\ \vec{r}(t+h) &:= \vec{r}(t) + \vec{v}(t+h/2)h \\ t &:= t+h \end{aligned}\right\} \text{ opakujeme}$$



- ekvivalentní Verletově metodě (identická trajektorie)
  ale: rychlosti v jiném čase, trochu ($\mathcal{O}(h^2)$) jiná kinetická energie

Ekvivalence metod Verlet and leap-frog

Leap-frog:

$$\left.\begin{aligned} v(t+h/2) &:= v(t-h/2) + a(t)h \\ r(t+h) &:= r(t) + v(t+h/2)h \\ t &:= t+h \end{aligned}\right\} \text{ opakuje se}$$

2. rovnici napíšeme dvakrát ve dvou časech

$$\begin{aligned} r(t+h) &= r(t) + v(t+h/2)h & \times +1 \\ r(t) &= r(t-h) + v(t-h/2)h & \times -1 \end{aligned}$$

Rovnice odečteme:

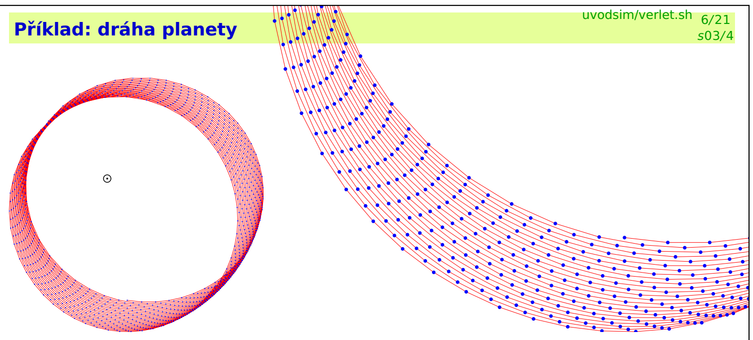
$$r(t+h) - r(t) = r(t) - r(t-h) + v(t+h/2)h - v(t-h/2)h$$

substituce pro rozdíl rychlostí:

$$r(t+h) - 2r(t) + r(t-h) = h[v(t+h/2) - v(t-h/2)] = a(t)h^2 = \frac{f(t)}{m}h^2$$

což jest Verletova metoda

Příklad: dráha planety



- energie se zachovává
- precese perihelia $\mathcal{O}(h^2)$
- harmonický oscilátor: frekvence je posunuta o $\mathcal{O}(h^2)$

Malý výlet do teoretické mechaniky a okolí

Eulerovy–Lagrangeovy rovnice

Náš svět: $\vec{r}^N = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}^N\}$, $\dot{\vec{r}}^N = \{\dot{\vec{r}}_1, \dots, \dot{\vec{r}}^N\}$

Funkce $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{r}^N, \dot{\vec{r}}^N)$

Akce

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}\,\mathrm{d}t$$

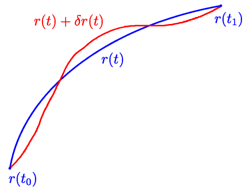
nabývá stacionárního bodu (extrému) mezi pevnými body $\vec{r}^N(t_0)$ a $\vec{r}^N(t_1)$ pro

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{r}}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i}$$

To je $3N$ rovnic.
Je-li $\mathcal{L}$ = Lagrangián, pak se to zove **Hamiltonův princip**, obecně „princip nejmenší akce“ apod.

Eulerovy–Lagrangeovy rovnice – důkaz

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}\,\mathrm{d}t$$



Provedeme **variaci** trajektorie:

$$\vec{r}^N(t) \to \vec{r}^N(t) + \delta\vec{r}^N(t), \quad \delta\vec{r}^N(t_0) = \delta\vec{r}^N(t_1) = 0$$

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i} \cdot \delta\vec{r}_i\,\mathrm{d}t + \int_{t_0}^{t_1} \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \cdot \delta\dot{\vec{r}}_i\,\mathrm{d}t$$

2. člen per partes:

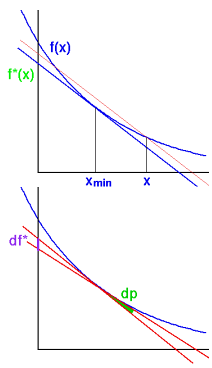
$$\delta S = \underbrace{\left[\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \cdot \delta\vec{r}_i\right]_{t_0}^{t_1}}_{=0} + \int_{t_0}^{t_1} \sum_i \delta\vec{r}_i \cdot \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{r}}_i}\right]\mathrm{d}t$$

(první [] = 0 protože koncové body jsou pevné)
$\delta\vec{r}_i$ mohou být libovolné ⇒ druhý [] = 0

Matematické osvěžení: Legendrova transformace

Mějme $f(x)$, nejraději konvexní.

$$f^* = f - x\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \quad \text{„jako funkce } p = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\text{“}$$



Matematicky přesněji:

$$f^*(p) = \min_x(f - xp)$$

Diferenciály:

$$\mathrm{d}f = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x = p\,\mathrm{d}x$$

$$\mathrm{d}f^* = \mathrm{d}f - \mathrm{d}(px) = p\mathrm{d}x - p\mathrm{d}x - x\mathrm{d}p = -x\mathrm{d}p$$

A zase zpátky:

$$\frac{\mathrm{d}f^*}{\mathrm{d}p} = -x, \quad f^{**} = f^* - \frac{\mathrm{d}f^*}{\mathrm{d}p}p = f^* + px = f$$

Menší odbočka – entalpie

Vnitřní energie $U = U(S, V)$:

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V \quad \text{[ad.]}$$

$U(V)$ [ad.] je konvexní, protože $p = -\frac{\partial U}{\partial V}$ je klesající funkcí V

Entalpie $H = H(S, p)$:

$$H = U - \frac{\partial U}{\partial V}V = U + pV$$

$$\mathrm{d}H = V\mathrm{d}p \quad \text{[ad.]}$$

A zase zpátky:

$$U = H - Vp = H - \frac{\partial H}{\partial p}p$$

Podobně $U(S) \to F(T)$, $F(N) \to \Omega(\mu)$, . . .

Příklad. Jak vypadají funkce $F(V)$ a $G(V)$ za konstantní teploty pro van der Waalsovu stavovou rovnici?

Od Newtona k Lagrangeovi

Nechť

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{r}_i^N, \dot{\vec{r}}_i^N) = E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}} = \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^2 - U(\vec{r}_i^N)$$

pak Lagrangeovy rovnice = Newtonovy rovnice

Hmmm... zatím nic nového.
Ale když použijeme **zobecněné souřadnice**

$$q_j = q_j(\vec{r}_1, \dots \vec{r}^N), \quad j = 1 \dots 3N$$

projde to taky!

Příklad: planeta – polární souřadnice (r, ϕ)

$$\mathcal{L} = E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + \frac{K}{r}$$

Eulerovy–Lagrangeovy rovnice:

$$m\ddot{r} = mr\dot{\phi}^2 - \frac{K}{r^2} \qquad \text{(Verleta nelze aplikovat)}$$

$$mr^2 \ddot{\phi} = 0 \quad \Rightarrow \quad mr^2 \dot{\phi} = \text{const} \qquad \text{(moment hybnosti)}$$

Od Lagranga k Hamiltonovi

Hybnost $\vec{p}_i = m_i \dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{r}}_i}$

Obecně (definice) zobecněné hybnosti: $p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}$

Příklad (planeta): $p_\phi = mr^2 \dot{\phi}$

Legendreova transformace: $\dot{\vec{r}}_i \to \vec{p}_i$ (až na znaménko)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\vec{r}^N, \vec{p}^N) = \sum_i \vec{p}_i \cdot \dot{\vec{r}}_i - \mathcal{L}$$

$\mathcal{L} = E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}}$

$\mathcal{H}$ se nazývá **Hamiltonián**

Kartézské souřadnice: $\mathcal{H} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$

Z Lagrangeových rovnic: $\dot{\vec{p}}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i}$

$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{r}}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i}$

⇒ **Hamiltonovy rovnice:**

$$\dot{\vec{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}_i}, \quad \dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i}$$

Zachování energie

Změna $\mathcal{L}$ se změnou poloh a rychlostí
(ne času: naše E_{pot} je konzervativní ⇒ $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = 0$)

$$\mathrm{d}\mathcal{L} = \sum_i \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i} \cdot \mathrm{d}\vec{r}_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \cdot \mathrm{d}\dot{\vec{r}}_i \right] = \sum_i (\dot{\vec{p}}_i \cdot \mathrm{d}\vec{r}_i + \vec{p}_i \cdot \mathrm{d}\dot{\vec{r}}_i)$$

Legendreova transformace:

$$\mathrm{d}\mathcal{H} = \sum_i \mathrm{d}(\vec{p}_i \cdot \dot{\vec{r}}_i) - \mathrm{d}\mathcal{L} = \sum_i [-\dot{\vec{p}}_i \cdot \mathrm{d}\vec{r}_i + \dot{\vec{r}}_i \cdot \mathrm{d}\vec{p}_i] \overset{!}{=} \sum_i \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}_i} \cdot \mathrm{d}\vec{r}_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i} \cdot \mathrm{d}\vec{p}_i \right]$$

Hamiltonovy rovnice:

$$\dot{\vec{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}_i}, \quad \dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i}$$

Pak ale taky:

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{H}}{\mathrm{d}t} = \sum_i \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}_i} \cdot \dot{\vec{r}}_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i} \cdot \dot{\vec{p}}_i \right] = 0$$

= zákon zachování energie (Hamiltonián je integrál pohybu)

Na vrabce stačí prak

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 + U(\vec{r}^N) \right]$$

$$= \sum_i \left[m_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \ddot{\vec{r}}_i + \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} \cdot \dot{\vec{r}}_i \right] = \sum_i \dot{\vec{r}}_i \cdot [m_i \ddot{\vec{r}}_i - \vec{f}_i] = 0$$

„Hroznej pták, to rogallo.
Vystřílel jsem na něj celej
zásobník, než toho chlapa pustil!“

Další integrály pohybu: Teorém Noetherové

Každé (diferencovatelné) symetrii (akce) fyzikálního systému odpovídá zachovávající se veličina.

- Čas → zachování energie
  předpoklad: $E_{\text{pot}}(t) = E_{\text{pot}}(t + \delta t)$
- Translace → hybnost

$$U(\vec{r}^N + \delta\vec{r}) = U(\vec{r}^N) \quad \Rightarrow \quad 0 = \delta\vec{r} \cdot \sum_i \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} = -\delta\vec{r} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i$$

Ježto $\delta\vec{r}$ je libovolné, zachovává se celková hybnost

- Rotace → moment hybnosti

$$U(\vec{r}^N + \delta\vec{\alpha} \times \vec{r}^N) = U(\vec{r}^N)$$

$$\Rightarrow \quad 0 = \sum_i (\delta\vec{\alpha} \times \vec{r}_i) \cdot \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} = -\sum_i (\delta\vec{\alpha} \times \vec{r}_i) \cdot m_i \ddot{\vec{r}}_i =$$

$$= -\sum_i \delta\vec{\alpha} \cdot (\vec{r}_i \times m_i \ddot{\vec{r}}_i) = -\delta\vec{\alpha} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_i \vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i$$

(Amalie) Emmy Noether

credit: Wikipedia

Zachovává se celkový moment hybnosti

Poisson a Liouville

Mějme $f = f(\vec{r}^N, \vec{p}^N)$. Hledáme časový vývoj, $f(t + \mathrm{d}t) = f(t) + \dot{f}\mathrm{d}t$.

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} \equiv \dot{f} = \sum_i \left[\frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \dot{\vec{r}}_i + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \dot{\vec{p}}_i \right] = \sum_i \left[\frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}_i} \right] \equiv \{f, \mathcal{H}\}$$

$\{,\}$ se zove **Poissonova závorka**

Platí $\{A, B\} = -\{B, A\}$

Je-li $f = f(\vec{r}^N, \vec{p}^N)$ integrál pohybu, platí $\{f, \mathcal{H}\} = 0$.

Je-li $f = f(\vec{r}^N, \vec{p}^N, t)$ integrál pohybu, platí $\{f, \mathcal{H}\} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0$

$\dot{\vec{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}_i}$

$\dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i}$

Definujme **Liouvilleův operátor**

$$i\hat{L} = \sum_i \left[\dot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} + \dot{\vec{p}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \right] = \sum_i \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \right] \equiv i\hat{L}_r + i\hat{L}_p$$

pak (pro $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$)

$$\dot{f} = \{f, \mathcal{H}\} = i\hat{L}f$$

Kvantovací úskok

Postulát: $\{,\} \to i\hbar[,]$ znaménka?

Např.: $\{p, x\} = -1 \Rightarrow [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$
(x, p = jakýkoliv pár sdružených kanonických proměných)

x-reprezentace: $\psi = \psi(x)$, $\hat{x} = x$, $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

To znamená, že $[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, x]\psi = -i\hbar\psi$ (to umíte)

Test konzistence formalismu: $\{p, f\} = -\frac{\partial f}{\partial x} \to [-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, f]\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}f\psi$

Podobně pro integrál pohybu $f = f(\vec{r}^N, \vec{p}^N, t)$:

$$\{\mathcal{H}, f\} = \frac{\partial f}{\partial t} \to [\hat{H}, f] = i\hbar\frac{\partial f}{\partial t} \text{ tj. } [\hat{H}, f]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f\psi$$

Vyhovuje $\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ (časová Schrödingerova rovnice); píšeme ale s obyč. derivací

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi$$

(vývoj vlnové funkce v čase, argumenty x nemohou na čase záviset)

Liouville

$$\dot{f} = i\hat{L}f$$

Formální (operátorové) řešení (separace proměnných)

$$\ln f = i\hat{L}t, \quad f(t) = \exp(i\hat{L}t) = \lim_{n\to\infty}(1 + i\hat{L}t/n)^n$$

Co to znamená?

- postupně $n\times$ opakujeme (přibližně)

$$f(0 + t/n) = (1 + i\hat{L}t/n)f(0) = f(0) + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}_{|t=0} t/n$$

- Taylor:

$$\exp(i\hat{L}t)f(0) = 1 + (i\hat{L}f)t + (i\hat{L}i\hat{L}f)\frac{t^2}{2} + \dots =$$

$$= 1 + \dot{f}(0)t + \ddot{f}\frac{t^2}{2} + \dots = f(t)$$

Obě části zvlášť

Stejný trik à la Taylor pro $i\hat{L}_r$ a $i\hat{L}_p$:

$$\exp(i\hat{L}_r t)f(\vec{r}^N, \vec{p}^N) = 1 + (i\hat{L}_r f)t + (i\hat{L}_r i\hat{L}_r f)\frac{t^2}{2} + \dots =$$

$$= 1 + \sum_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} t + \sum_j \dot{\vec{r}}_j \sum_i \dot{\vec{r}}_i : \frac{\partial^2 f}{\partial \vec{r}_i \vec{r}_j} \frac{t^2}{2} + \dots = f(\vec{r}^N + \dot{\vec{r}}^N t, \vec{p}^N)$$

$$\exp(i\hat{L}_p t)f(\vec{r}^N, \vec{p}^N) = f(\vec{r}^N, \vec{p}^N + \dot{\vec{p}}^N t)$$

Zrada: operátory $i\hat{L}_p$ a $i\hat{L}_r$ nekomutují

$$\exp(i\hat{L}) = \exp(i\hat{L}_p + i\hat{L}_r) \neq \exp(i\hat{L}_p)\exp(i\hat{L}_r)$$

Verlet podruhé

Tož aspoň přibližně (pro malé h) a ovšem reverzibilně:

$$\exp(i\hat{L}h) \approx \exp(i\hat{L}_p h/2)\exp(i\hat{L}_r h)\exp(i\hat{L}_p h/2)$$

Postupně (vynechávám ^{N}):

$$\begin{array}{lccr}
(& \vec{p}(0) & , & \vec{r}(0) &) \\
(& \vec{p}(0) + \dot{\vec{p}}(0)h/2 & , & \vec{r}(0) &) \\
(& \vec{p}(0) + \dot{\vec{p}}(0)h/2 & , & \vec{r}(0) + (1/m)[\vec{p}(0) + \dot{\vec{p}}(0)h/2]h &) \\
(& \vec{p}(0) + [\dot{\vec{p}}(0) + \dot{\vec{p}}(h)]h/2 & , & \vec{r}(0) + (1/m)[\vec{p}(0) + \dot{\vec{p}}(0)h/2]h &)
\end{array}$$

To je tzv. **rychlostní Verlet** (*velocity Verlet*)

$$r(t+h) = r(t) + v(t)h + \frac{f(t)}{m}\frac{h^2}{2}$$

$$v(t+h) = v(t) + \frac{f(t) + f(t+h)}{m}\frac{h}{2}$$

Stejná trajektorie, rychlost jako Verlet s $v(t) = \frac{r(t+h) - r(t-h)}{2h}$

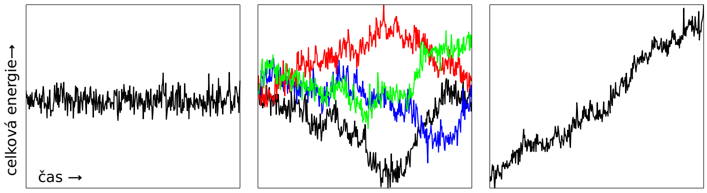
K čemu to je dobré?

$$\exp(i\hat{L}_p h/2)\exp(i\hat{L}_r h)\exp(i\hat{L}_p h/2) = \exp(i\hat{L}h + \epsilon)$$

- chybu ϵ umíme odhadnout ($\propto h^3$)
- zpětně lze spočítat porušený Hamiltonián (chyba $\propto h^3$ na krok neboli $\propto h^2$ celkem), který Verletova metoda přesně zachovává
  tj. Verlet je **symplektický** $\Rightarrow$ chyba je omezená
  (pouze reverzibilita $\Rightarrow$ chyba $\propto t^{1/2}$)

chyba zachování energie se používá k nastavení délky kroku h

- metody vyššího řádu, multiple-timestep metody



symplektický reverzibilní ireverzibilní